

引用格式: CHEN Yixin, FU Xiuhua, ZHANG Gong, et al. Design Method of Notch Filter Based on One-dimensional Photonic Crystal Band Structure[J]. Acta Photonica Sinica, 2021, 50(11):1131002
陈奕辛,付秀华,张功,等. 基于一维光子晶体能带结构的陷波滤光片设计方法[J]. 光子学报, 2021, 50(11):1131002

基于一维光子晶体能带结构的陷波滤光片 设计方法

陈奕辛¹, 付秀华¹, 张功¹, 张静¹, 杨飞²

(1 长春理工大学 光电工程学院, 长春 130022)

(2 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 长春 130033)

摘 要: 陷波滤光片应用广泛, 但难点在于用传统传输矩阵法进行光谱设计时, 计算量过大且膜系结构和材料种类复杂。将固体物理理论中晶体内周期性势场 Bloch 波的多重 Bragg 散射后特殊色散关系与光学薄膜理论中麦克斯韦方程组结合, 计算出一维光子晶体(即薄膜)周期性函数并获得能带结构; 分析与介质折射率(介质折射率比)、中心波长和入射角度改变相对应的能带结构中禁带宽度和位置的变化; 推导出具体函数关系。将陷波滤光片的光谱要求带入函数关系式进行计算, 将结果带入 Essential Macleod 薄膜设计软件中进行膜系设计。与传统传输矩阵法进行比较, 结果表明基于一维光子晶体能带结构的设计方法比传统传输矩阵法计算量小很多、周期结构简单且只需两种材料, 光谱曲线均能满足设计要求。

关键词: 一维光子晶体; 色散关系; 能带结构; 光子禁带; 膜系设计; 陷波滤光片

中图分类号: O484

文献标识码: A

doi: 10.3788/gzxb20215011.1131002

Design Method of Notch Filter Based on One-dimensional Photonic Crystal Band Structure

CHEN Yixin¹, FU Xiuhua¹, ZHANG Gong¹, ZHANG Jing¹, YANG Fei²

(1 College of Photoelectric Engineering, Changchun University of Science and Technology, Changchun 130022, China)

(2 Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China)

Abstract: Notch filters are widely used, but the difficulty lies in the large amount of calculation and complex film structure and material types when using the traditional transmission matrix method for spectrum design. In this paper, the special dispersion relation of the multiple Bragg scattering of the periodic potential field Bloch wave in the crystal in the solid state physics theory is combined with the Maxwell equations in the optical film theory to calculate the periodic function of the one-dimensional photonic crystal (ie film) and obtain the band structure; the change of the forbidden band width and position in the energy band structure corresponding to the change of the medium refractive index (medium refractive index ratio), center wavelength and incident angle is analyzed; the specific functional relationship is deduced. Bring the spectral requirements of the notch filter into the functional relation for calculation, and bring the result into the Essential Macleod thin film design software for film system design. Compared with

基金项目: 国家重点研发计划(No. 2017YFE0102900), 中国科学院青年创新促进会优秀会员(No. Y202053), 国家自然科学基金(No. 11973040)

第一作者: 陈奕辛(1998-), 女, 硕士研究生, 主要研究方向为光学薄膜。Email: yxchen201802@163.com

导师(通讯作者): 付秀华(1963-), 女, 教授, 博士, 主要研究方向为光学薄膜。Email: goptics@163.com

收稿日期: 2021-05-06; **录用日期:** 2021-08-18

<http://www.photon.ac.cn>

the traditional transfer matrix method, the results show that the design method based on the one-dimensional photonic crystal band structure is much less computationally intensive, the periodic structure is simple, and only two materials are needed. The spectral curve can meet the design requirements.

Key words: One-dimensional photonic crystal; Dispersion relationship; Energy band structure; Forbidden rejection band; Film design; Notch filter

OCIS Codes: 310.4165; 310.6805; 310.6860; 310.6188; 350.4238

0 引言

光子晶体是指具有光子带隙特性的人造周期性电介质结构,其最显著特点即为可以控制光子运动。1998年GHAEMI H F和GRUPP D E等在探索金属薄膜的亚微米圆柱腔的光学特性时,通过其透射光谱发现光子发生的变化与固体物理中电子通过周期结构后的现象类似^[1-2];2013年CHOI H J和CHOI S提出了一种基于光子晶体层的透射型结构,使用优化设计的多层木桩光子晶体构造用于红色、绿色和蓝色波段的选择性带通滤光片^[3];2020年韩国庆北大学的YUN S D将一维光子晶体光子带隙的概念与离子体彩色滤波器结合,抑制来自高阶共振模式的等离子体彩色滤波器的不期望的传输峰,最终设计光谱达到了较高的颜色纯度^[4]。

国内外对以光子晶体概念设计带通滤光片的研究越来越多,但通过光子晶体对陷波滤光片进行光谱设计还很少。在生物医疗、拉曼光谱分析、荧光测试、激光防护等方面陷波滤光片(器)都有广泛的应用^[5]。目前陷波滤光片的主要设计方法为传输矩阵法,根据麦克劳德的推导,需要分别计算出六个变量:反射率和反射带宽的关系、材料折射率比、周期数、等效折射率、等效厚度和膜堆的匹配,这种方法计算量大且很难获得直观的解析解^[6-9]。一维光子晶体结构与光学薄膜结构相同,即沿一个方向介质周期性排列,规整膜系结构的光学薄膜即服从麦克斯韦方程组(Maxwell's equations)^[7],也满足固体物理无限周期的晶体理论^[10-12],薄膜的设计光谱决定于材料折射率、中心波长、周期结构和入射角度四个变量。

经计算推导得出,确定周期为两介质无限交替排列的前提下,将材料折射率、中心波长和入射角度变化对光谱的截止区(反射区)的影响转化为三者对光子禁带的影响,经过计算和拟合,得到三者与光子禁带的关系。本文基于固体物理中一维光子晶体Bloch波特殊色散的能带结构,得到能带结构中的禁带与折射率、中心波长和入射角度之间的函数表达式。已知陷波滤光片的光谱要求,将截止区的带宽和位置带入函数表达式中,计算出材料折射率、中心波长和入射角度;计算出的参数带入Essential Macleod薄膜设计软件中进行验证。验证结果表明,本研究提出的一维光子晶体能带结构法设计的陷波滤光片光谱与传统传输矩阵法设计的光谱基本完全重合,且本研究方法计算量小,设计过程简便。

1 能带结构

Maxwell方程组结合固体物理的无限周期晶体理论可知,光子晶体中Bloch波发生多重Bragg散射后,通过特殊色散关系的周期性函数获得能带结构^[10],以能带结构中的光子禁(通)带对光谱进行分析。对于光子晶体而言,光学薄膜讨论的截止区(反射区)可视为光子晶体的禁带,透过区为通带。

根据一维光子晶体与薄膜概念的结合,对三种最常用的介质排列基本周期的色散关系进行分析,即 $(AB)^{\infty}N$ 、 $(ABA)^{\infty}N$ 和 $(ABBA)^{\infty}N$,并假设周期 N 无限大。如图1,频率为 ω 的平面波是以 θ_0 从左向右斜入射到光子晶体表面,介质A、B的厚度设为 $d_A = d_1$ 、 $d_B = d_2$;晶格周期设为 $d = d_1 + d_2$ 。

$(AB)^{\infty}N$ 结构中光波的一维周期光子晶体的色散关系^[13-15]

$$\cos(kd) = \cos\delta_A \cos\delta_B - \frac{1}{2} \left(\frac{\eta_A}{\eta_B} + \frac{\eta_B}{\eta_A} \right) \sin\delta_A \sin\delta_B \quad (1)$$

$$\delta_i = \frac{2\pi}{\lambda} n_i d_i \cos\theta_i = k_{iz} d_i \quad (2)$$

$$\theta_i = \arcsin(n_0 \sin\theta_0 / n_i) \quad (3)$$

$$\eta_i = n_i \cos\theta_i \quad (4)$$

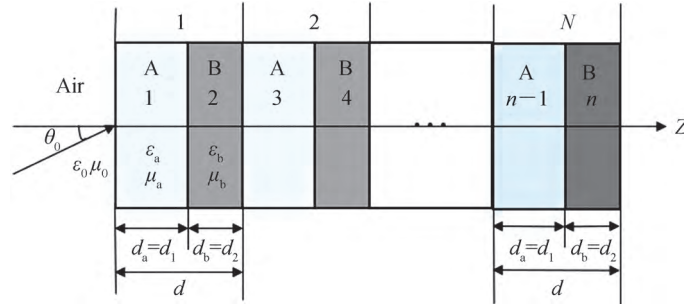

 图1 (AB)^N一维光子晶体的周期结构

 Fig. 1 (AB)^N periodic structure of 1-D photonic crystal

式中, δ_i 、 η_i 、 d_i 、 n_i 和 λ 分别为介质 A、B 中传播时产生的相位差即相位延迟量、有效光学导纳、物理厚度、折射率和波长。

图 1 中介质 A 替换成 A 和 B, 晶格周期 $d = d_1 + d_2 + d_1$, (ABA)^N 结构中光波的色散关系为

$$\cos(kd) = \cos^2 \delta_A \cos \delta_B - \sin^2 \delta_A \cos \delta_B - \left(\frac{\eta_A}{\eta_B} + \frac{\eta_B}{\eta_A} \right) \sin \delta_A \sin \delta_B \cos \delta_A \quad (5)$$

依次类推, 可知 (ABBA)^N 结构中光波的色散关系为

$$\cos(kd) = \cos^2 \delta_A (\cos^2 \delta_B - \sin^2 \delta_B) + \sin^2 \delta_A (\sin^2 \delta_B - \cos^2 \delta_B) - 2 \left(\frac{\eta_A}{\eta_B} + \frac{\eta_B}{\eta_A} \right) \sin \delta_A \sin \delta_B \cos \delta_A \cos \delta_B \quad (6)$$

$-1 \leq \cos(kd) \leq 1$ 时, k_z 有实数解, Bloch 波为非衰减波, 对应光通带; $\cos(kd) = \pm 1$ 时, 对应禁带边缘; $|\cos(kd)| > 1$ 时, k 为复数, Bloch 波为衰减波, 对应光禁带。(AB)^N、(ABA)^N 和 (ABBA)^N 对应的色散曲线如图 2, 红色箭头所指区域为禁带。

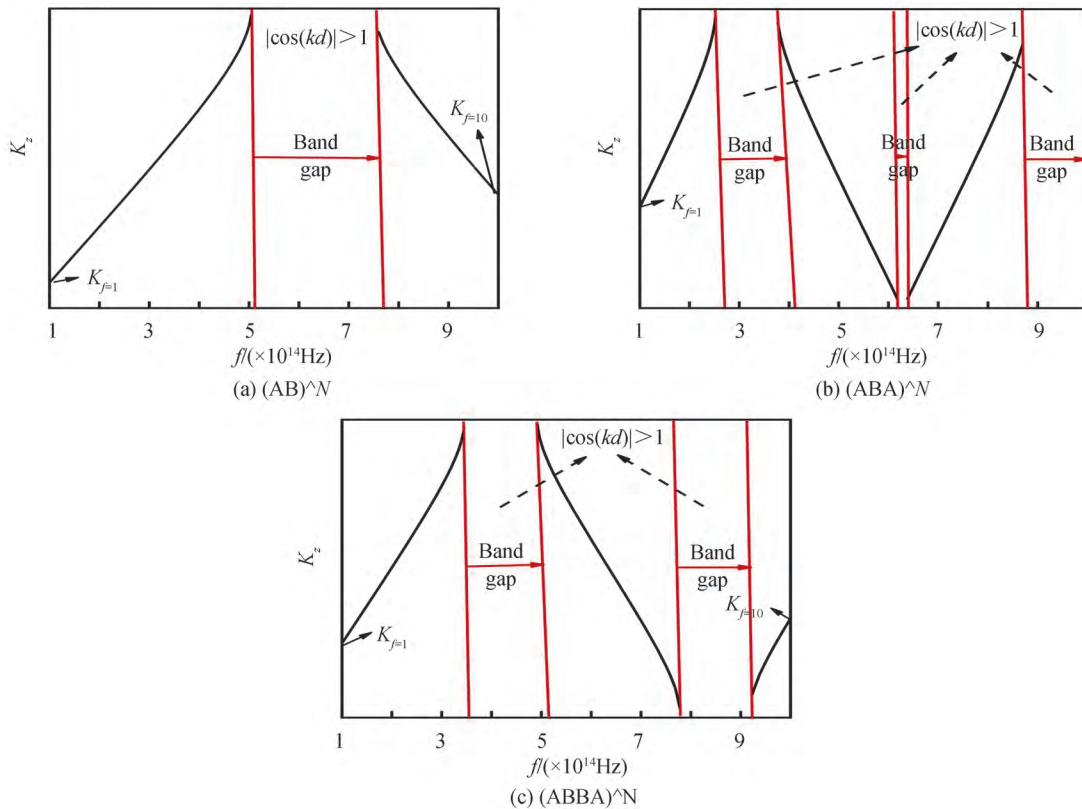

 图2 (AB)^N、(ABA)^N和(ABBA)^N的色散曲线

 Fig. 2 Dispersion curve of (AB)^N, (ABA)^N and (ABBA)^N

由图2可知,在各参数相同的条件下,随着基础周期中介质层的叠加,同一频率范围内的禁带数开始增多,对应的禁带宽度减小;色散曲线斜率绝对值越大;曲线整体向低频方向移动,色散的最大值最小值保持不变。奇数禁带相对偶数禁带较宽,且在同一色散曲线中每个禁带中心的两侧通带均对称。

2 光子禁带

陷波滤光片的应用波段很广,以常用的可见波段为例,带入具体参数对禁带的变化进行推导和计算,材料选取可见及近红外波段范围内的常用材料。

设 $(AB)^N$ 和 $(ABA)^N$ 两周期结构中除厚度以外的所有参数均相同, $(ABA)^N$ 中介质A的厚度为 $(AB)^N$ 厚度的一半,其中 $n_A = 1.3, n_B = 2.45, \theta_0 = 30^\circ, \lambda_0 = 500 \text{ nm}, d_i = \lambda_0 / 4n_i (i = 1, 2)$,其色散曲线分别如图3所示。其他参数不变的前提下,基础周期内不管每层厚度如何变化,只要介质A、B的总厚度分别相同,色散曲线均不发生改变。

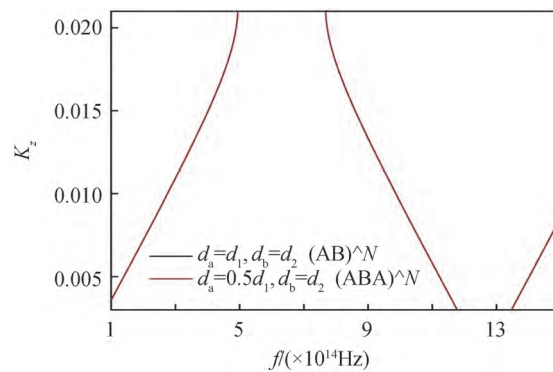


图3 厚度 d_1, d_2 和 $1/2d_1, d_2$ 对应的色散曲线

Fig. 3 Dispersion curve corresponding to thickness d_1, d_2 and $0.5 d_1, d_2$

由式(1)、(5)和(6)可知,禁带位置及宽度取决于介质折射率、厚度和入射角这三个变量,下面以 $(AB)^N$ 为基础周期,分别分析三个变量对禁带宽度和位置的改变。

2.1 介质折射率对禁带宽度的影响

可见及近红外波段较为常用材料的光学参数如表1。

表1 常用材料折射率^[7]
Table 1 Refractive index of common materials^[7]

Material _L	n	Material _H	n
Na_3AlF_6	1.3/1.38	TiO_2	1.9/2.3
MgF_2	1.38	H_4	2.1
SiO_2	1.46	Ta_2O_5	2.16
Al_2O_3	1.54/1.62	Ti_3O_5	2.35
YbF_3	1.52/1.48	ZnS	2.35/2.16
SiO	1.55	Ge	4.4

图4(a)中 n_a 为1.38,图4(b)中 n_B/n_A 为1.7,中心波长及晶格周期均与图3相同。根据表3中的材料参数, n_A 取值范围为1.22~1.62, n_B 取值范围为1.9~4.5, n_B/n_A 取值在1.4~4内。由图4和图5可知,折射率比为定值、 n_A 值为变量时禁带宽度的变化,远小于 n_A 值为定值、折射率比为变量时禁带宽度的变化。

两种情况下相比其他禁带的变化,第一禁带宽度变化趋势明显且一致。对第一禁带宽度进行计算,图6表明第一禁带宽度与 n_A/n_B 和 n_A 值均有线性正比关系,即在两者之一为定值的前提下,另一变量增大,宽度也随之增大。表2为图6的拟合结果,函数表达式为

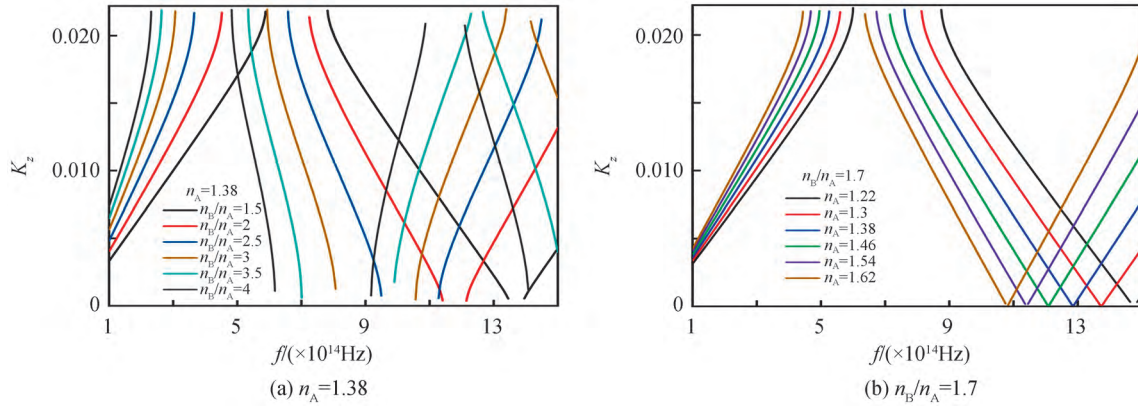

 图4 $n_A = 1.38$ 和 $n_B/n_A = 1.7$ 的色散曲线

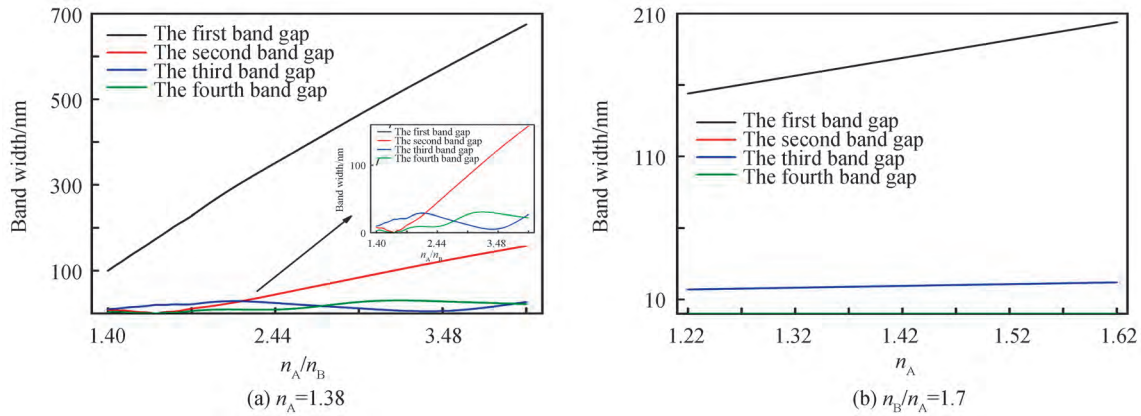
 Fig. 4 Dispersion curve of $n_A = 1.38$ and $n_B/n_A = 1.7$

 图5 $n_A = 1.38$ 和 $n_B/n_A = 1.7$ 的禁带宽度

 Fig. 5 Band gap of $n_A = 1.38$ and $n_B/n_A = 1.7$

$$f(x) = p_3 x + p_4 \quad (7)$$

n_A 为定值时,随 n_B/n_A 增大,色散曲线通带部分斜率绝对值增大,曲线向低频方向移动,同一频率范围内出现多个禁带,第二禁带宽度减小至 0 后持续增大。如图 7 所示,第三禁带宽度与 n_B/n_A 存在类正弦曲线的

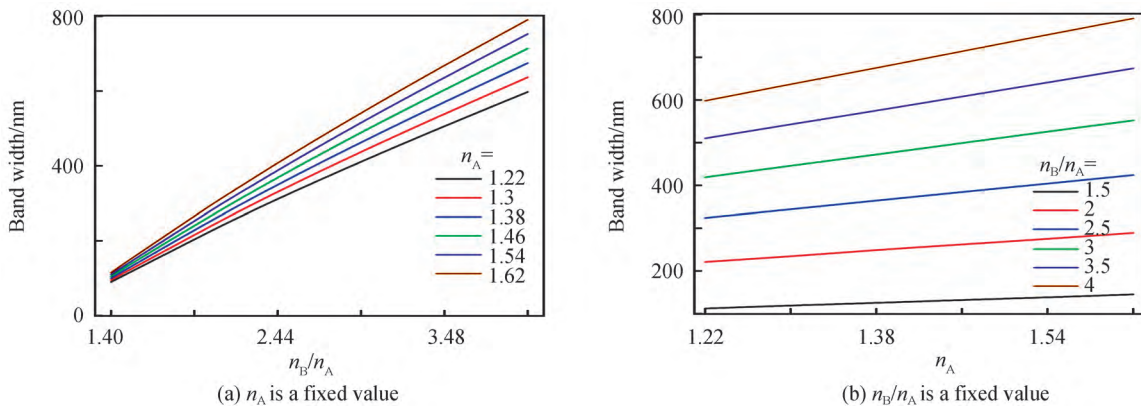

 图6 n_A 为定值和 n_B/n_A 为定值时第一禁带的宽度

 Fig. 6 The width of the first band gap when n_A or n_B/n_A is a fixed value is the fixed value

表2 n_A 为定值和 n_B/n_A 为定值时的拟合系数值Table 2 The value of the fitting coefficient when n_A or n_B/n_A is a fixed value

n_A	p_3	p_4	n_B/n_A	p_3	p_4
1.22	195.7	-174.7	1.5	81.79	12.36
1.3	208.9	-187.8	2	170	13.6
1.38	221.9	-201.8	2.5	250	19
1.46	223.2	-214.8	3	332.9	13.01
1.54	247.8	-226	3.5	409.6	10.14
1.62	260.5	-237.8	4	482.9	9.01

函数关系,增大至极大值后减小至0,依次循环;第四禁带与第三禁带趋势相反。且在第三禁带宽度达到0时,第四禁带宽度达到最大值^[16],但反之不成立。表3~5为图7曲线拟合结果,第二禁带拟合表达式为

$$f(x) = p_5x + p_6 \quad (8)$$

第三、四禁带拟合函数表达式为

$$f(x) = a_1 \sin(b_1x + c_1) + a_2 \sin(b_2x + c_2) + a_3 \sin(b_3x + c_3) \quad (9)$$

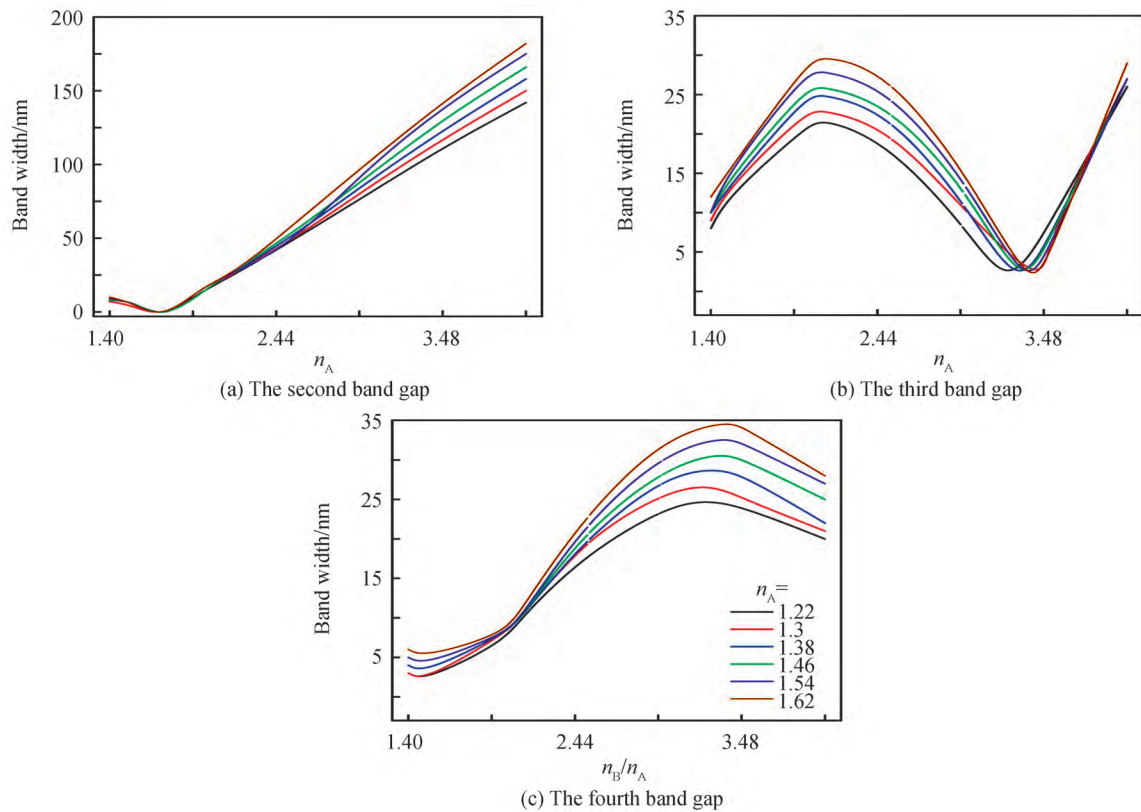
图7 当 n_A 为定值时第二禁带、第三禁带和第四禁带的禁带宽度

Fig.7 When n_A is a fixed value, the forbidden band width of the second forbidden band, the third forbidden band and the fourth forbidden band

图7中第二、三、四禁带在折射率比1.4~4之间均存在0值点,即禁带消失。分别对拟合后的函数求导,计算结果显示,第二、四禁带在折射率比为1.7时消失;第三禁带0值点随折射率比增大而向右移动,具体数据如表6。

表 3 第二禁带的拟合系数值
Table 3 Fitting coefficient value of the second band gap

n_A	$n_B/n_A < 1.7$		$n_B/n_A > 1.7$	
	p_5	p_6	p_5	p_6
1.22	-23.57	40.14	63.02	-110
1.3	-23.57	40.14	66.79	-117.3
1.38	-27.86	47.71	70.51	-124.1
1.46	-27.86	47.71	74.43	-131.9
1.54	-30.71	52.43	78.78	-140.8
1.62	-33.57	57.14	81.63	-145

表 4 第三禁带的拟合系数值
Table 4 Fitting coefficient value of the third band gap

n_A	a_1	a_2	a_3	b_1	b_2	b_3	c_1	c_2	c_3
1.22	19.14	183.8	186.6	0.369	4.78	4.713	1.246	0.197 4	-9.074
1.3	20.24	135	137.2	0.462 1	4.84	4.744	0.927 4	-0.021 58	-9.227
1.38	22.14	100.6	103.5	0.497 4	4.887	4.757	0.859 1	-0.272 9	-9.401
1.46	22.81	130.7	132.4	0.589 7	4.921	132.4	0.532	-0.337 4	-9.521
1.54	24.17	127.3	129.2	0.691 6	4.819	4.707	0.212 3	-0.036 79	-9.205
1.62	35.62	14	4.808	0.009 035	2.978	7.958	0.540 9	7.478	-3.945

表 5 第四禁带的拟合系数值
Table 5 Fitting coefficient value of the fourth band gap

n_A	a_1	a_2	a_3	b_1	b_2	b_3	c_1	c_2	c_3
1.22	30.87	22.71	3.824	0.886 6	1.427	2.764	-0.416 8	1.942	7.032
1.3	377.6	364	2.825	0.807	0.888	3.215	0.850 1	3.827	6.142
1.38	396.7	388.1	1.715	0.826 7	0.889 9	3.549	0.7702	3.796	4.953
1.46	41.76	34.82	2.985	0.846 6	1.354	3.25	-0.016	2.35	5.766
1.54	27.44	9.238	3.796	0.596	2.532	3.408	-0.549	-0.497	5.888
1.62	35.43	11.1	7.783	0.588 3	3.975	4.598	-0.787 5	-3.809	3.906

表 6 第三禁带消失时对应的 n_A 和 n_B/n_A
Table 6 The corresponding n_A and n_B/n_A when the third forbidden band disappears

n_A	n_B/n_A
1.22	3.26
1.3	3.288
1.38	3.316
1.46	3.344
1.54	3.72
1.62	3.4

n_B/n_A 为定值时, n_A 值递增, 曲线向低频方向移动, 第三禁带宽度与 n_A 成线性正比函数关系, 斜率正负取决于 n_A 具体值的范围。为验证同一折射率比下的二、四禁带宽度的变化趋势, 分别对不同折射率比的色散关系进行分析。图 8 表明二、四禁带宽度存在最小值, 与第三禁带最小值不同, 仅当 $n_B/n_A=1.7$ 时二、四禁带宽度才为 0; $n_B/n_A \leq 2$ 时二、四禁带宽度与 n_A 无关, 分别保持定值; $n_B/n_A > 2$ 时随比值增大, 二、四禁带与 n_A 值成正比, 且具有线性关系, 斜率随比值增加而增大。表 7 为图 8 曲线拟合系数, 函数表达式为

$$f(x) = p_7x + p_8 \tag{10}$$

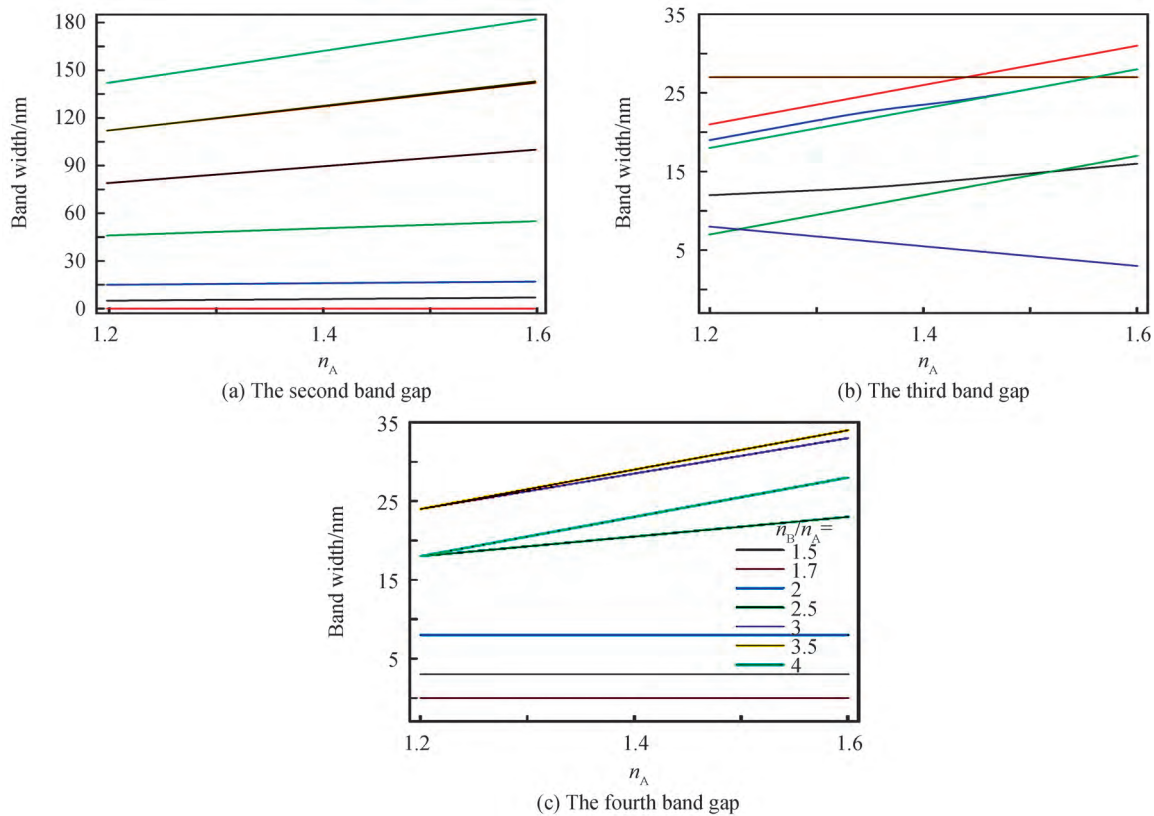


图8 折射率比为定值的禁带宽度
Fig. 8 Forbidden band width with constant refractive index ratio

表7 第二、三、四禁带的拟合系数值

Table 7 Fitting coefficient values of the second, third, and fourth band gaps

n_B/n_A	Second band gap		Third band gap		Fourth band gap	
	p_7	p_8	p_7	p_8	p_7	p_8
1.5	0	7	12.5	-3.25	0.1	3
2	0.4	15	239.3	-280.5	0.2	8
2.5	22.5	18.55	25	-11.5	12.5	2.75
3	52.5	14.95	12.5	-6.25	22.5	-3.45
3.5	77.5	17.45	-12.5	23.25	25	-6.5
4	100	20	0	27	25	-12.5

2.2 厚度/中心波长

设介质层厚度满足 $n_i d_i = x_i \times \lambda_0 / 4 (i = 1, 2)$, 其中 x_i 为常数, n_i 和 d_i 始终成反比。由 2.1 节可知 n_B/n_A 对禁带的影响远大于 n_A , 当系数 $x_i = 1$ 、中心波长 $\lambda_0 = 500 \text{ nm}$ 和入射角 $\theta_0 = 30^\circ$ 均保持定值时, 如图 9 所示, n_B/n_A 为定值时, 色散曲线随 n_A 的增大而向低频方向移动, 但各禁带宽度和位置的变化极小, 可忽略不计。

图 10 中系数 $x_i = 1$ 、 $d_i = \lambda_0 / 4n_i$, 其他参数同图 9。 λ_0 在 $300 \sim 1100 \text{ nm}$ 内, 以步长 200 nm 取值, 色散曲线随 λ_0 增大向低频方向移动, 通带部分斜率保持不变, 禁带数目增多, 禁带宽度始终增大, 其中第一禁带斜率最大。 λ_0 处于第一禁带的中点位置, 第二、四禁带由于材料折射率比的取值, 斜率极小, 但呈上升趋势。

分析可知折射率比的变化对色散曲线的改变最大, 而 n_A 的变化对色散曲线的改变相比折射率比可忽略不计。因此, 对不同折射率比下中心波长对各禁带宽度及位置进行具体分析, 结果如图 11 和图 12。可知, 不同折射率比下禁带宽度和位置与中心波长均成线性正比关系, 第二、三和四禁带位置随折射率比变化不明显, 曲线几乎重合, 拟合系数相同。禁带宽度和位置变化曲线的拟合结果分别为表 8 和表 9, 拟合表达式为

$$f(x) = p_1 x + p_2 \quad (11)$$

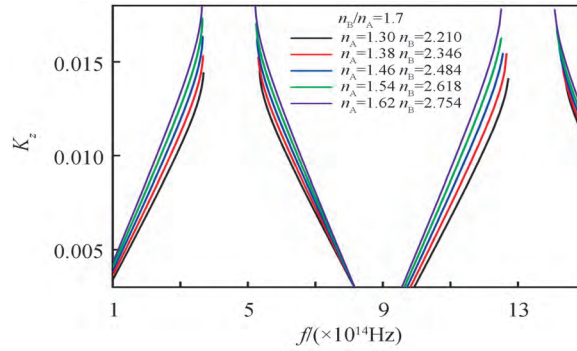


图9 系数、中心波长、入射角度和折射率比均相同时的色散曲线

Fig. 9 Dispersion curve when coefficient, center wavelength, incident angle and refractive index ratio are the same

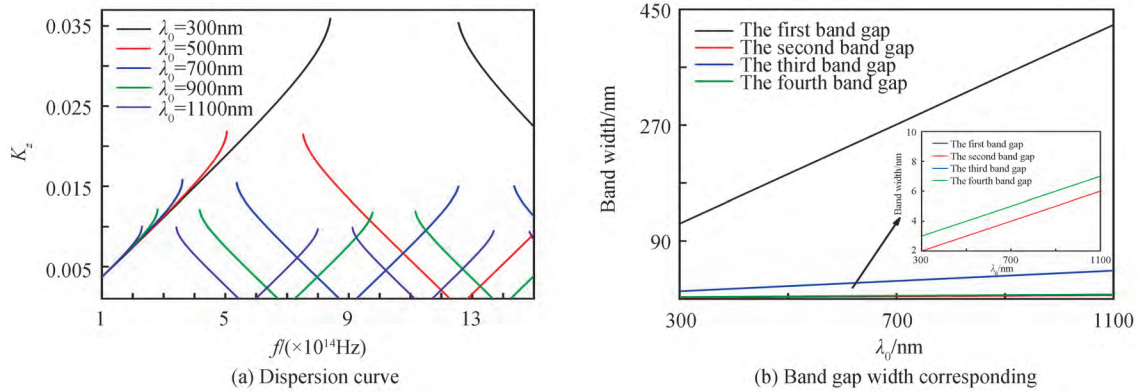


图10 中心波长300~1100 nm对应的色散曲线和禁带宽度

Fig. 10 Dispersion curve and band gap width corresponding to center wavelength 300~1100 nm

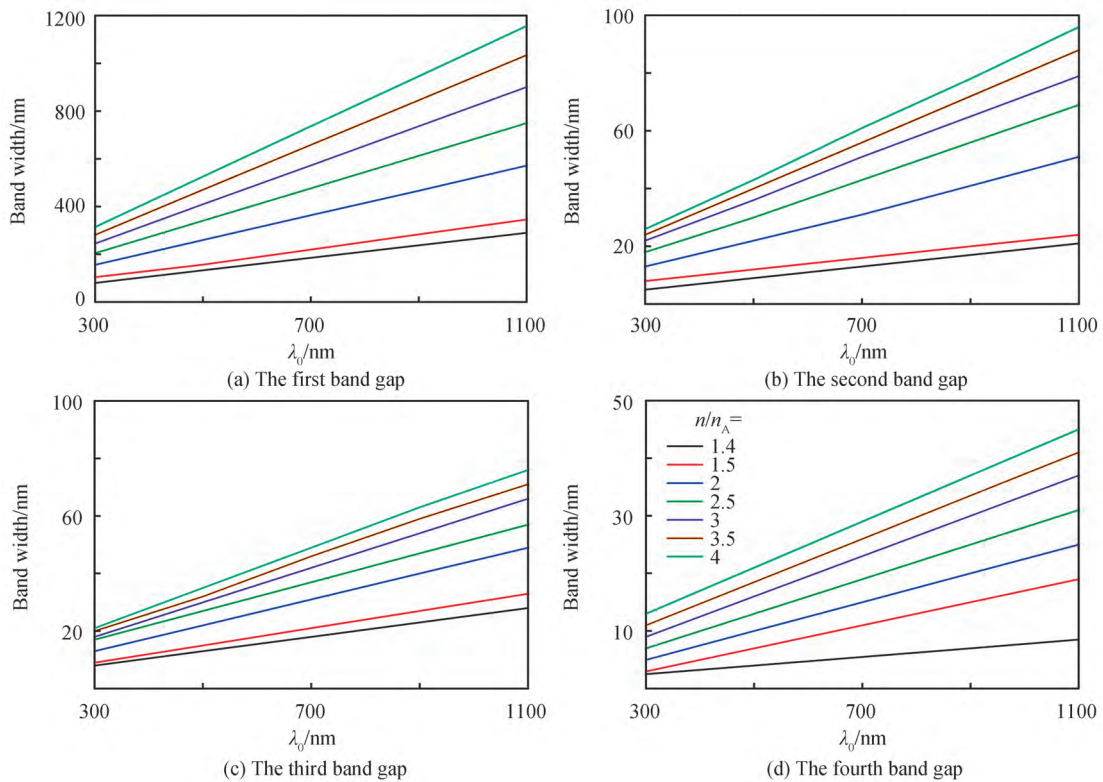


图11 不同折射率比下中心波长各禁带的宽度

Fig. 11 The width of the band gap of the center wavelength under different refractive index ratios

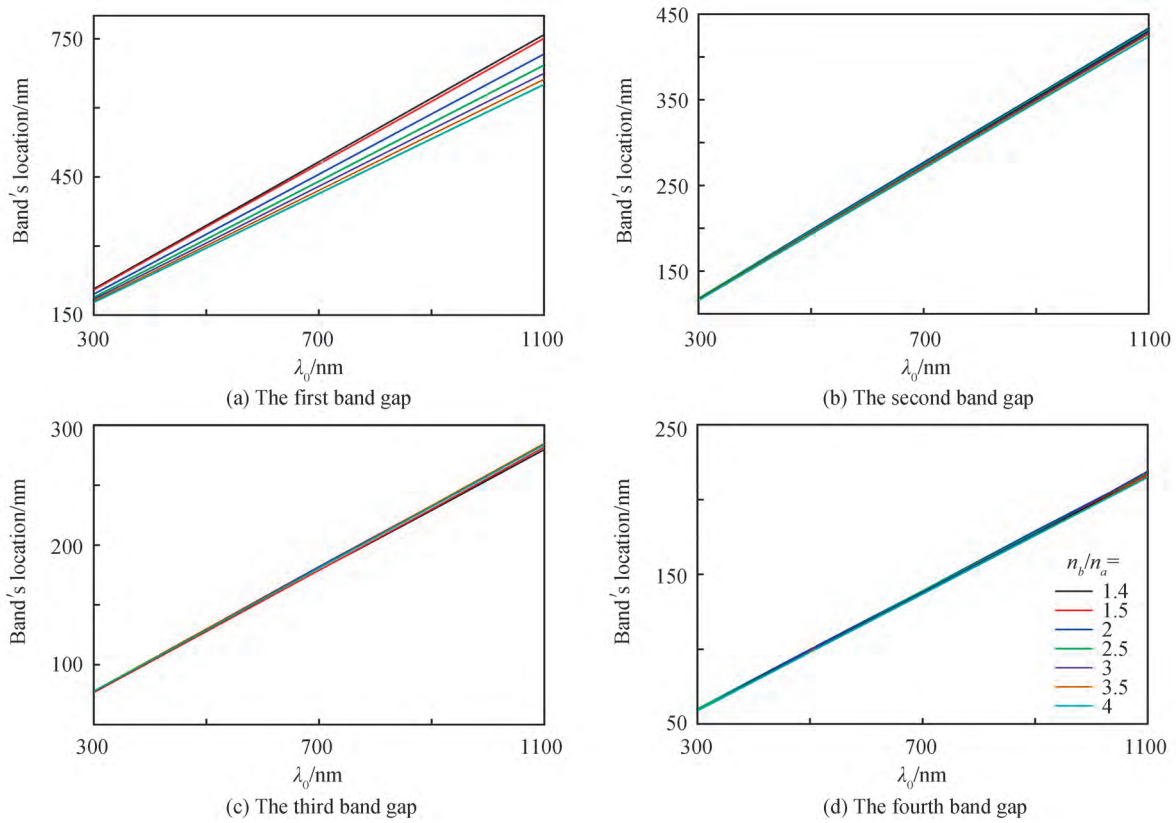


图 12 不同折射率比下中心波长各禁带结束的位置

Fig. 12 The position where each band gap of the center wavelength ends under different refractive index ratios

表 8 四个禁带的拟合系数值

Table 8 Fitting coefficient values of the four band gaps

n_b/n_a	First band gap		Second band gap		Third band gap		Fourth band gap	
	p_1	p_2	p_1	p_2	p_1	p_2	p_1	p_2
1.4	0.262 5	1.65	0.018 5	-0.35	0.026 5	-0.15	0.007	1.1
1.5	0.304 5	9.25	0.022 5	0.45	0.031	-0.3	0.011 5	-0.45
2	0.519 5	0.15	0.047 5	-1.65	0.045	-0.5	0.022 5	-0.95
2.5	0.681	0.5	0.062	-0.6	0.054	-0.2	0.029	-0.7
3	0.819 5	-0.45	0.071 5	0.55	0.06	0	0.031	0.9
3.5	0.940 5	0.25	0.08	0	0.064 5	0.45	0.036 5	1.45
4	1.052	-0.2	0.087 5	-0.45	0.069	0.3	0.04	0

表 9 四个禁带的拟合系数值

Table 9 Fitting coefficient values of the four band gaps

n_b/n_a	First band gap		Second band gap		Third band gap		Fourth band gap	
	p_1	p_2	p_1	p_2	p_1	p_2	p_1	p_2
1.4	0.85	0						
1.5	0.842	0.6						
2	0.801	0.35						
2.5	0.78	0	0.318	0.35	0.0255	0.85	0.196	0.225
3	0.773	0.9						
3.5	0.765	0.35						
4	0.751 5	0.35						

2.3 入射角度

图 13 中以入射角 θ_0 以 $0\sim 90^\circ$ 为范围,以 15° 为步长取值,其他参数同 4。随着入射角增大,禁带向高频方向移动,第一、二、四禁带宽度增大;第三禁带宽度减小,但斜率趋近于 0。经拟合可知, $0\sim 15^\circ$ 入射范围内, $\sin\theta_0$ 数值变化较小,色散曲线变化不明显,各个禁带的位置和宽度在 $\pm 5\text{ nm}$ 范围内变化,可忽略不计。表 10 为图 13(b) 的曲线拟合系数,函数表达式为

$$f(x)=p_9x^2+p_{10}x+p_{11} \tag{12}$$

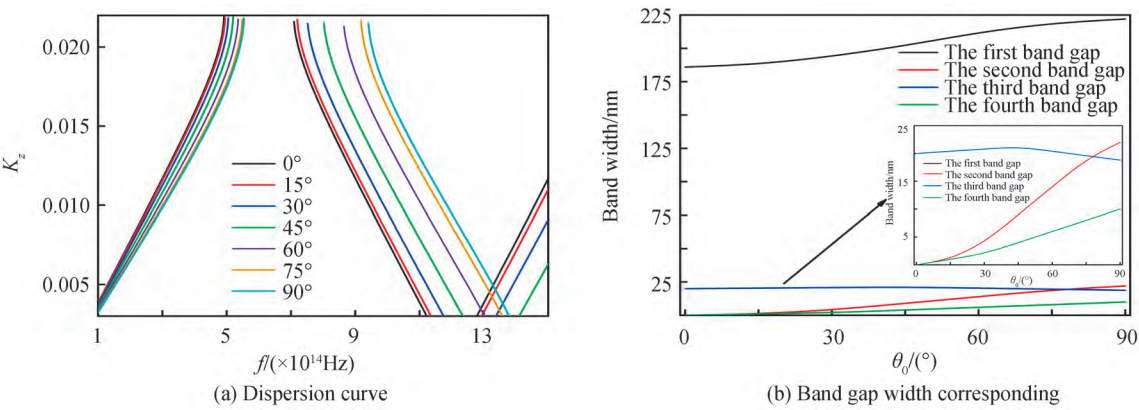


图 13 不同入射角对应的色散曲线和禁带宽度

Fig. 13 The dispersion curve and band gap width corresponding to different incident angles

表 10 四个禁带的拟合系数值
Table 10 Fitting coefficient values of the four band gaps

Coefficien	p_9	p_{10}	p_{11}
First band gap	0.015 19	−0.100 5	186.1
Second band gap	0.007 725	−0.050 79	0.047 62
Third band gap	0.002 828	−0.006 061	20.01
Fourth band gap	0.000 529 1	0.066 67	−0.119

从固体物理角度,通过无限周期光子晶体中 Bloch 波的特殊色散得到周期性函数,继而获得能带结构,计算并拟合出能带结构中的禁带与折射率、中心波长和入射角的函数关系式。禁带的位置和宽度与折射率、介质层厚度和入射角度三个变量有关。与 n_A 值相比 n_B/n_A 的变化对禁带宽度影响较大,且 n_B/n_A 越大,禁带宽度增长趋势越大;介质层厚度对禁(通)带位置影响较大;入射角度对禁(通)带位置和宽度影响相对较小。第一禁带的位置始终包含中心波长, $\theta=30^\circ$ 时 $\sin 30^\circ=0.5$,第一禁带的中点位置即为中心波长。入射角为 $0^\circ\sim 30^\circ$, $n_B/n_A=1.7$,且 $n_i d_i=\lambda_0/4(i=1,2)$ 时,偶数禁带带宽均为 0,即禁带消失。只有 n_B/n_A 一个变量的情况下,第三禁带消失时,第四禁带宽度达到最大值。

综上所述任意周期结构都可以通过 $(AB)^N$ 改变 A、B 介质厚度演变过来,在设计陷波滤光片时,以 $(AB)^N$ 为周期进行设计。按光谱要求中的截止区(即禁带)波段范围,先确定周期结构中所需要的低折射率材料(n_A);将低折射率材料和禁带宽度带入禁带与折射率的函数关系式中,计算出高折射率材料(n_B);再将禁带位置带入禁带与中心波长的关系式,计算出中心波长。确定好材料和中心波长后,带入禁带与入射角的关系式分析出满足设计要求时的角度范围。

3 计算

为使一维光子晶体能带结构法与传统传输矩阵法的对比更直观,选用文献[17]中提到的 RGB 陷波滤光片以两种方法分别进行设计,光谱要求为可见波段光谱截止区分别为 $385\sim 505\text{ nm}$ 、 $525\sim 575\text{ nm}$ 、 $600\sim 700\text{ nm}$,其他波段均透过,即禁带宽度分别为 120 nm 、 50 nm 、 100 nm [17]。

3.1 传输矩阵法

确定形式为(AB)⁻SA的规整波堆的反射率与半宽度和高反射带宽之间的关系;计算所需折射比,选取两种材料做基本单元,确定周期数以满足截止区的反射率;计算出以(0.5AB 0.5A)为基础周期的等效折射率及对应的等效厚度,将减反射膜堆添加在主膜系两边,最后对截止区进行优化。

传输矩阵法是根据麦克劳德的推导,以文献[17]中的绿色陷波滤光片为例进行详细计算,即截止区525~575 nm,其他波段透过。最常用设计多层膜的周期元是(0.5AB 0.5A),该周期的等效折射率 E 是波长的函数

$$\frac{E}{n_A} = \left\{ \frac{\cos \frac{\pi}{2} \frac{\lambda_0}{\lambda} - \frac{1 - n_B/n_A}{1 + n_B/n_A}}{\cos \frac{\pi}{2} \frac{\lambda_0}{\lambda} - \frac{1 - n_B/n_A}{1 + n_B/n_A}} \right\}^{1/2} \quad (13)$$

等效厚度 Γ 为

$$\Gamma = \arccos \left[1 - \frac{(1 + n_B/n_A)^2}{2n_B/n_A} \sin^2 \frac{\pi \lambda_0}{2\lambda} \right] \quad (14)$$

用周期为(AB)⁻SA的1/4波堆的反射率 $1 - T_{\min}$ 与半宽度 w 和高反射带宽度 $2\Delta g$ 之间的关系,确定 $2\Delta g$,其关系式为

$$\frac{2\Delta g}{w} = 1 - [T_{\min}/17.676]^{0.2137} \quad (15)$$

继而得到所需材料的折射率比

$$\frac{n_B}{n_A} = \frac{1 + \sin\left(\frac{\pi}{4} 2\Delta g\right)}{1 - \sin\left(\frac{\pi}{4} 2\Delta g\right)} \quad (16)$$

材料A的折射率需满足

$$n_A = n_0 = n_g \quad (17)$$

挑选出材料A、B作为周期多层膜的基础单元(0.5AB 0.5A),引用近似式(18)决定周期数以满足反射带所需的反射率要求^[7],式中 S 为周期数

$$T_{\min} \approx 4 \left(\frac{n_g n_0}{n_A^2} \right) \left(\frac{n_B}{n_A} \right)^{2S} \quad (18)$$

在基础膜系两旁安置(A/2 C A/2)的周期结构,以式(19)确定 n_c 和周期数,其等效折射率为

$$E(n_A, n_c) = \sqrt{n_A E(n_A, n_B)} \quad (19)$$

等效光学厚度为

$$d = (2j + 1) \frac{\lambda_0}{4} \quad (20)$$

式中, $E(n_A, n_c)$ 和 $E(n_A, n_B)$ 分别为(0.5AC 0.5A)和(0.5AB 0.5A)的等效折射率。计算得 $n_A = 1.56$, $n_{B1} = 2.34$, $n_{B2} = 1.91$, $n_c = 1.38$, $\lambda_0 = 5300$ nm,整体膜系为(3B₂3A)⁻2 (3B₁3A)⁻6 (3B₂3A)⁻2 2B₂C。红、蓝陷波滤光片同理进行计算,透过率光谱如图14(b)和图15(b)中虚线所示。

3.2 光子晶体能带结构法

可见和近红外的波段范围在300~3000 nm,对应频率范围10~1。色散曲线的第一禁带最靠近低频区即长波方向,第二、三、四禁带依次向高频区即短波方向移动;第一禁带宽度基数大,变化范围宽,相比其他禁带更适合用于长波方向的宽截止滤光片。

对基本周期结构和厚度的分析可知,三个陷波滤光片的膜系均为|(AB)⁻N|。结合固体理论的色散曲线计算是以无限周期进行的,而实际膜系设计中需要结合厚度及光谱需求,经计算 N 为8时即可达到禁带要

求,厚度也在允许范围内。低折射率材料选择最常用的SiO₂,理论折射率 $n_A=1.46$,禁带宽度为120 nm,入射角0°,选用色散曲线中的第一禁带,带入表2、式(14)和表4、式(15),确定中心波长为438 nm, $n_B/n_A=1.5$;禁带宽度为50 nm和100 nm,选用第二禁带,分别带入式(14)和表2,中心波长确定为1 650 nm和1 885 nm;在不改变介质折射率、角度的情况下,第二禁带无法达到100 nm,增加一组周期介质,其他参数不变,中心波长增大为2 042 nm。为使两组周期介质的禁带叠加,在基础周期前乘一个系数,系数值为两个中心波长的比值,膜系确定为|(AB)⁻⁸1.0833(AB)⁻⁸|,透过率光谱如图14(b)和图15(b)实线所示。

4 结果与对比

表11为RGB陷波滤光片的设计要求及图14和图15的实际禁带(截止区),满足设计要求。且经计算,入射角0~15°内,RGB陷波滤光片的禁带和透过率曲线基本不发生改变。

表 11 RGB陷波滤光片设计要求的禁带(截止区)及对应的实际结果
Table 11 The forbidden band (cut-off zone) required by the design of RGB notch filter and the corresponding actual results

RGB notch filter	Design requirements/nm	Dispersion curve/nm	Transmittance spectrum/nm
Bule notch filter	385~505	385~505	386~504
Green notch filter	525~575	525~575	526~575
Red notch filter	600~700	600~654/650~700	601~653/651~700

图14和图15中显示,一维光子晶体能带结构法与传统传输矩阵法获得的结果一致,均具有设计陷波滤光片的能力。通过上述两种方法计算过程的对比可以看出,当采用传统传输矩阵法设计陷波滤光片时,首

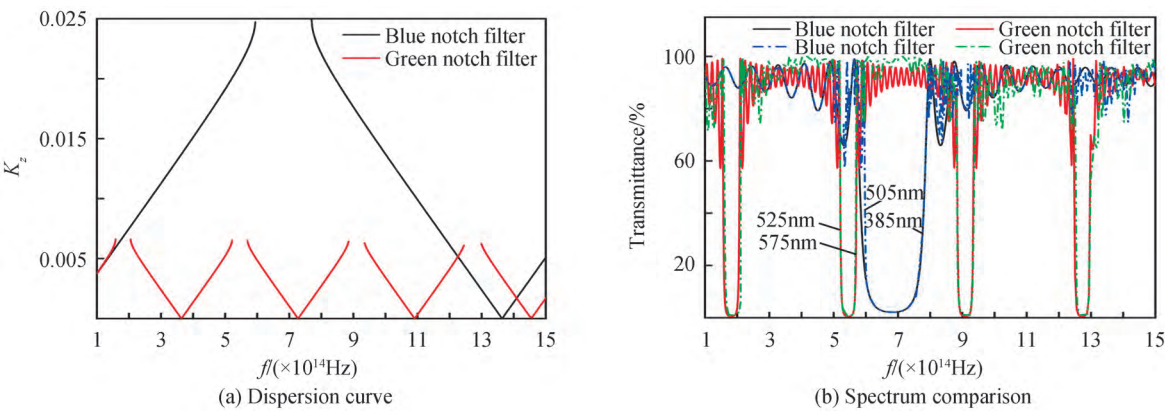


图 14 蓝色和绿色陷波滤光片的色散曲线及光谱对比
Fig. 14 Dispersion curve and spectrum comparison of blue and green notch filters

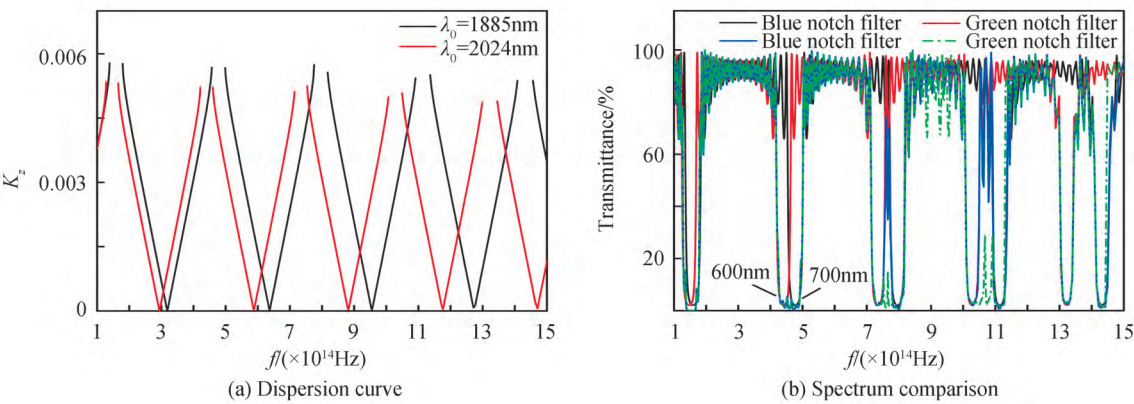


图 15 蓝色和绿色陷波滤光片的色散曲线及光谱对比
Fig. 15 Dispersion curve and spectrum comparison of blue and green notch filters

先需要根据设计要求计算折射率比,再根据实际波段筛选材料,逐一计算折射率范围,至少需要三种以上不同折射率材料进行设计,而现实中的常用薄膜材料通常不能与计算值一一对应。当实际折射率与计算折射率差距较大时,需要根据等效折射率理论,采用两种常用折射率材料,通过构造 PMP 结构来替代计算的折射率。等效折射率计算过程复杂,并且很难获得完全理想的计算结果,还需要进一步针对目标进行优化计算,设计过程十分复杂。而采用一维光子晶体能带结构法,只需要选出式(7)~(12)中与光谱要求对应的三个线性函数关系式和相关的拟合系数表,将光谱要求带入其中,直接计算出两种材料折射率、中心波长和入射角度三个参数后直接进行设计,计算量小,设计过程简单。

5 结论

本文将晶体周期性势场中 Bloch 波的多重 Bragg 散射后特殊色散关系(能带结构)与麦克斯韦方程组结合,推导并计算出禁带位置和宽度与介质折射率(介质折射率比)、中心波长和入射角度之间的函数关系式。设计陷波滤光片膜系时,以 $(AB)^{-N}$ 为周期,按光谱要求中的截止区(即禁带)波段范围,分别将禁带的宽度和位置带入与折射率和中心波长对应的函数关系式中,再将其带入与入射角的函数关系式中确定入射角范围。将计算出的折射率、中心波长和角度范围带入 Essential Macleod 薄膜设计软件中进行验证。对比验证结果表明,提出的一维光子晶体能带结构法比传输矩阵法得计算量小的多,仅需两种材料且周期结构简单,设计出的光谱曲线均能达到设计要求。

参考文献

- [1] EBBESEN T W, LEZEC H J, GHAEMI H F, et al. Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays[J]. *Nature*, 1998, 391(6668):1114-1117.
- [2] GHAEMI H F, THIO T, GRUPP D E, et al. Surface plasmons enhance optical transmission through subwavelength holes [J]. *Physical Review B*, 1998, 58(11):6779.
- [3] CHOI H J, CHOI S, YOO Y E, et al. Transmission-type photonic crystal structures for color filters[J]. *Optics Express*, 2013, 21(15):18317-18324.
- [4] YUN S D. Efficient design method for plasmonic filter for tuning spectral selectivity[J]. *Crystals*, 2020, 10(6):531.
- [5] GAO Peng, YIN Xiaojun, ZHAO Shuai, et al. Notch filter designed by a quasi-rugate method[J]. *Optical Instruments*, 2013(6):82-90.
高鹏, 阴晓俊, 赵帅锋, 等. 陷波滤光片的类褶皱设计[J]. *光学仪器*, 2013(6):82-90.
- [6] SHANKAR A, KUMAR S. Using a pair of antireflection layer in a minus filter to suppress ripples in the HUD-beam combiner[J]. *Journal of Optics*, 2014, 43(3): 257-259.
- [7] 唐晋发, 顾培夫, 刘旭, 等. 现代光学薄膜技术[M]. 杭州:浙江大学出版社, 2006.
- [8] WANG Xiaodong, CHEN Bo, HUO Tonglin, et al. Design of second-order 121.6-nm narrowband minus filters using asymmetrically apodized thickness modulation[J]. *Applied Physics B*, 2018, 124(7):139.
- [9] ZHANG Jinlong, XIE Yujiang, CHENG Xinbing, et al. Thin-film thickness-modulated designs for optical minus filter[J]. *Applied Optics*, 2013, 52(23): 5788-5793.
- [10] SANTOSA F, ZHANG H. Photonic band gap phenomenon in a metal-dielectric periodic structure[J]. *Research in the Mathematical Sciences*, 2020, 7:15.
- [11] GUIQIANG Du, ZHOU Xiache, CHI Pang, et al. Efficient modulation of photonic bandgap and defect modes in all-dielectric photonic crystals by energetic ion Beams[J]. *Advanced Optical Materials*, 2020, 8(19): 2000426.
- [12] ABADLA M M, ABOHASSAN K M, ASHOUR H S. One-dimensional binary photonic crystals of graphene sheets embedded in dielectrics[J]. *Physica B: Condensed Matter*, 2020, 601: 412436.
- [13] BENDICKSON J, DOWLING J, SCALORA M. Analytic expressions for the electromagnetic mode density in finite, one-dimensional, photonic band-gap structures [J]. *Physical Review E Statistical Physics Plasmas Fluids & Related Interdisciplinary Topics*, 1996, 53(4):4107-4121.
- [14] YUE C, TAN W, LIU J. Photonic band gap properties of one-dimensional Thue-Morse all-dielectric photonic quasicrystal[J]. *Superlattices & Microstructures*, 2018, 117:252-259.
- [15] YE H P, AMNON Y, HONG C. Electromagnetic propagation in periodic stratified media. I. General theory[J]. *Journal of the Optical Society of America*, 1977, 67(4):423-438.

- [16] 李柄辉. 全极化宽带角度选择透明结构研究[D]. 杭州:浙江大学, 2020.
- [17] JIANG Yunfeng, WU Dongsheng, HUANG Fuyu. Design of true-color night vision system based on minus filters[J]. Acta Optica Sinica, 2019, 39(12): 1211003.
- 蒋云峰, 武东生, 黄富瑜. 基于负滤光片的真彩色夜视系统设计[J]. 光学学报, 2019, 39(12): 1211003